

MULTI.XLS でのモデルの定義法

山岡 清

1. はじめに

何人かの人に MULTI.XLS でのモデル定義がよくわからないと質問がありましたのでこし細かく説明します。EXCEL には VBA (EXCEL 用 Visual Basic) が付属しています。VBA により EXCEL を複雑に詳細に制御することができます。VBA はたしかに EXCEL の付属していますが、この両者は基本的に別物と考えたほうがよいようです。関数も異なる名前になっている場合があります。

たとえばルート関数($\sqrt{\quad}$)は EXCEL では SQRT ですが VBA では SQR です。

また EXCEL にはあって VBA にはない場合や逆も真です。ただし VBA は Cell に直接 EXCEL コマンドを書き込み機能があるので VBA は EXCEL の機能をすべて含むと考えることができます。

2. Function

MULTI をつかうのに前もってモデルを定義する必要があります。モデルはプログラムの Function モジュールで行います。上部のツールバーで

ツール (T) > マクロ (M) > Visual Basic Editor (V)

これで VBA 編集画面となります。

左上にモジュールというアイコンがでますので、その左の + をクリックしますと Function のアイコンが出ます。それをクリックすると次の画面となります。

関数をここに定義します

```
'  
'  
Function pconc(t, j)  
  On j GoTo line1, line2, line3  
line1:  
  pconc = p(1) * Exp(-p(2) * t) + p(3) * Exp(-p(4) * t)  
  GoTo last  
line2:  
  pconc = 0  
  GoTo last  
line3:  
  pconc = 0  
last:  
End Function
```

モデルはここに定義します。pconc が従属変数、t が独立変数、p(1)、p(2)、... が推定すべきパラメータです。時間経過が 1 つの場合は line1 の部分だけを書き換えます。

3. 実際のモデル定義例

3-1. 静注コンパートメントモデル

$$C_p = A e^{-\alpha t} + B e^{-\beta t} + \dots$$

$$pconc = p(1) * \exp(-p(2) * t) + p(3) * \exp(-p(4) * t) + \dots$$

3.2 経口一次吸収モデル

$$C_p = \frac{FD ka}{Vd(ka - ke)} (e^{-ket} - e^{-kat})$$

この場合は投与量 D が定数、F と Vd が分離できないので Vd/F とする。投与量を 10mg/kg とすると、

$$d = 10.0$$

$$pconc = d * p(2) / p(1) / (p(2) - p(3)) * (\exp(-p(3) * t) - \exp(-p(2) * t))$$

ラグタイム t_0 がある場合。

$$C_p = \frac{FD ka}{Vd(ka - ke)} (e^{-ke(t-t_0)} - e^{-ka(t-t_0)})$$

t_0 と p(4) とすると、

$$\text{if } t < p(4) \text{ then } pconc = 0.0$$

if $t \geq p(4)$ then
 $pconc = d * p(2) / p(1) / (p(2) - p(3)) * (\exp(-p(3) * (t - p(4))) - \exp(-p(2) * (t - p(4))))$
この場合は Simplex 法しか収束しない。

4.3 点滴静注モデル

to 時間の点滴後、点滴を中止した場合、

$$C_p = C_{ss}(1 - e^{-ket}) \quad (t < to)$$

$$C_p = C_{ss}(1 - e^{-keto}) e^{-ke(t-to)} \quad (t - to)$$

if $t < p(1)$ then $pconc = p(2) * (1 - \exp(-p(3) * t))$

if $t \geq p(1)$ then $pconc = p(2) * (1 - \exp(-p(3) * p(1))) * \exp(-p(3) * (t - p(1)))$

参考文献

- 1) 田中善正、山岡 清、「化学者のためのマイコンガイド」南江堂 (1981)
- 2) 山岡 清、谷川原祐介、「マイコンによる薬物速度論入門」南江堂(1983)
- 3) 山岡 清、「マイコンによる薬物動態解析法」南江堂 (1984)
- 4) 杉山雄一、山下伸二、加藤基裕、「ファーマコキネティクス」南山堂(2003)